Med Berdey

Université Abdelmalek Essaâdi
Faculté des sciences et techniques
Département de Génie Chimique
Tanger

10/11
semestre 1
MIPCI

T. D. de Chimie générale : Série n°3

1/2 Module C121 (Atomistique)

I- 1- Donner la configuration électronique de Al(z = 13) dans son état fondamental (placer les électrons dans des cases quantiques)?

2- Indiquer les valeurs des 4 nombres quantiques caractérisant les électrons de la couche de valence de Al?

3- Calculer l'énergie de chacun des électrons de Al dans son état fondamental ? en déduire l'énergie totale de Al?

4- Calculer l'énergie de l'ion Al^{3+} dans son état fondamental ?

II- 1- Donner la configuration électronique des éléments suivants : N^{3-}(z=7), S^{2-}(z=16), Ar(z=18), K^{+}(z=19), Ti(z=22), Co(z=27), Kr(z=36) et Rb^{+} (z=37)? Indiquer la couche de valence dans des cases quantiques ?

2- Représenter ces configurations sous forme d'électrons de cœur (représentés par la structure d'un gaz noble) et de la couche de valence?

III- 1- Etablir, à l'aide de la règle de Klechkowski, la structure électronique du Ti(z = 22) dans son état fondamental.?

2- Calculer l'énergie correspondante à la configuration : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^4$?

3- En déduire la structure réelle adoptée par le Ti ?

IV- Donner parmi les configurations électroniques suivantes, celles qui représentent un état fondamental ou incorrect (justifier) ?

a-$1s^2 1p^6 2s^2$, b-$1s^2 2s^2 2p^2 3s^2 3p^2$, c-$1s^2 2s^3$, d-$1s^2 2s^2 2p^4$, e-$1s^2 2s^2 2p^6 2d^{10} 3s^2$.

V- les configurations électroniques suivantes sont elles correctes, sinon donner la règle non respectée ?

a-$2s^2 2p^4$: [↑↓][↑↓][↑][↑]

b-$2s^2 2p^4$: [↑↓][↑↓][↑↓][ ]

c-$3s^1 3p^3$: [↑][↑][↑][↑]

d-$4d^{11}$: [↑↑↑][↑↓][↑↓][↑↓][↑↓]

ETUSUP .com

"T.D de chimie"
"général Serie n°3"

Exercice (I):

4) Al^{3+}, $\underbrace{1s^2}_{1}$ $\underbrace{2s^2 2p^6}_{2}$
Gr

$E = 2E_1 + 8E_2$

$E = 2(-2190,09) + 8(-266,97)$

$\boxed{E = -6570,56\ eV}$

(car les e^- du groupe 3 n'ont aucun effet d'écran

$\Rightarrow \begin{cases} E_1(Al) = E_1(Al^{3+}) \\ E_2(Al) = E_2(Al^{3+}) \end{cases}$

Exercice III:

$Ti : Z = 22.$

1) D'après la règle de Klechkowski

Ti : $\underbrace{1s^2}_{1}$ $\underbrace{2s^2 2p^6}_{2}$ $\underbrace{3s^2 3p^6}_{3}$ $\underbrace{4s^2}_{5}$ $\underbrace{3d^2}_{4}$
groupe Slater

Soit A la configuration électronique de Ti selon la règle de Klechkowski

$E_A = 2E_1 + 8E_2 + 8E_3 + 2E_4 + 2E_5$ ($3d^2$, $4s^2$)

2) Soit B la configuration électronique

$\underbrace{1s^2}_{1}$ $\underbrace{2s^2 2p^6}_{2}$ $\underbrace{3s^2 3p^6}_{3}$ $\underbrace{3d^4}_{4}$
Slater

$E_B = 2E'_1 + 8E'_2 + 8E'_3 + 4E'_4$

Or nous avons $E_1 = E'_1$
$E_2 = E'_2$
$E_3 = E'_3$

car pour A et pour B on a $\{1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6\}$ qui ne change pas, et de plus on sait les e^- des groupes 4 et 5 n'ont aucun effet d'écran sur les groupes 1, 2, 3.

$\Rightarrow E_A = cte + 2E_4 + 2E_5$
$E_B = cte + 4E'_4$

Il faut donc calculer uniquement E_4, E_5, E'_4

$E_4 = -13,6 \dfrac{Z_4^{*2}}{3^2}$

$Z_4^* = Z - \sum_j \sigma_j = 22 - 0,35 \times 1 - 1 \times 1$
$= 3,65.$

$E_4 = -13,6 \dfrac{(3,65)^2}{3^2} = -20,1320$

$E_5 = -13,6 \dfrac{Z_5^{*2}}{4^2}$

$Z_5^* = Z - \sum_j \sigma_j = 22 - 1 \times 0,35$
$- 10 \times 0,85 - 10 \times 1$
$= 3,15.$

$E_5 = -13,6 \dfrac{3,15^2}{4^2} = -8,43$

$E'_4 = -13,6 \dfrac{Z'^{*2}_4}{3^2}$

$Z'^*_4 = Z - \sum_j \sigma_j = 22 - 3 \times 0,35 - 18$
$= 2,95$

$E'_4 = -13,6 \dfrac{2,95^2}{3^2} = -13,15\ eV$

$E_A - E_B = cte + 2E_4 + 2E_5 - (cte + 4E'_4)$
$= 2E_4 + 2E_5 - 4E'_4$
$= 2(20,132) + 2(-8,43) - 4(-$
$= -4,53$

3) $E_A - E_B < 0$
$\Rightarrow E_A < E_B$

$\Rightarrow$ La conf A (Klechkowski) est plus stable que la conf B

ETUSUP .com

T.D de Chimie générale

Serie : n° "3"

Rappel : Configuration éléctronique des atomes polyéléctroniques :

Pour remplir les cases quantique (ou OA) l'un atome polyélectronique on doit suivre 4 règles de remplissage :

1. Principe des stabilité maximale :

Dans l'état fondamental, les e⁻ occupent les niveaux de plus basse énergie.

2. Règle de KLECHOWSKY :

Elle donne l'ordre de remplissage des O.A basé sur les calculs d'énergie.

$1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p \ldots$

3. Règle de Pauli :

2 e⁻ d'un m̂ atome ne peuvent pas avoir leurs 4 nbres quantiques égaux. Pour 2 e⁻ ayant n, l, m égaux (ils sont dans la m̂ case quantique), $s = +\frac{1}{2}$ et $s = -\frac{1}{2}$

⇒ Antiparallèles [↑↓]

4. Règle de HUND :

Les e⁻ occupent le maximum d'OA (case quantique) de m̂ énergie.

Exercice (II) :

Elt	Conf. éléctronique	Couche de Valence	é de coeur et couche de valence
He (Z=2)	$1s^2$	[↑↓]	[He]
C (Z=6)	$1s^2 2s^2 2p^2$	[↑↓][↑][↑]	[He] $2s^2 2p^2$
Ne (Z=10)	$1s^2 2s^2 2p^6$	[↑↓][↑↓][↑↓][↑↓]	[Ne]
N^{3-} (Z=7)	$1s^2 2s^2 2p^6$	[↑↓][↑↓][↑↓][↑↓]	[Ne]
Na (Z=11)	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	[↑]	[Ne] $3s^1$
Ar (Z=18)	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	[↑↓][↑↓][↑↓][↑↓]	[Ar]
S^{2-} (Z=16)	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	[↑↓][↑↓][↑↓][↑↓]	[Ar]
K^+ (Z=19)	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	[↑↓][↑↓][↑↓][↑↓]	[Ar]
Ti (Z=22)	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^2$	[↑↓][↑][↑][ ][ ][ ]	[Ar] $4s^2 3d^2$
Co (Z=27)	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^7$	[↑↓][↑↓][↑↓][↑][↑][↑]	[Ar] $4s^2 3d^7$
Kr (Z=36)	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$	[↑↓][↑↓][↑↓][↑↓]	[Kr]
Rb^+ (Z=37)	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6$	[↑↓][↑↓][↑↓][↑↓]	[Kr]

Exercice (IV) :

a) $1s^2 \underbrace{1p^6} 2s^2$

incorect : 1p n'existe pas, car pour n = 1, l = 0 ⇒ Orbital 1s uniquement

b) $1s^2 \cancel{2p} 2s^2 \underbrace{2p^2} 3s^2 3p^2$

incorect : Il faut remplir 2p avant de commencier à remplir 3s

Principe de stabilité non respecte.

c) $1s^2 2s^3$

[↑↓↑] impossible, car 2 e⁻ ne peuvent pas avoir 4 nbres quantiques égaux ⇒ au maximum 2 e⁻ dans une case quantique (PAULI)

d) $1s^2 2s^2 2p^4$

[↑↓] [↑↓] [↑↓|↑|↑] 8O correct.

) $1s^2 2s^2 2p^6 \underbrace{2d^{10}} 3s^2$

Incorrect car 2d n'existe pas car pour

$n=2$ $\begin{cases} l=0 \Rightarrow s \\ l=1 \Rightarrow p \end{cases}$ (pas de d)

Exercice (V)

) $2s^2 2p^4$ [↑↓] [↑↓|↑|↑] correct

) $2s^2 2p^4$ [↑↓] [↑↓|↑↓|]

Incorrect, Règle de Hund non respecté.

) $3s^2 3p^3$ [↑] [↑|↑|↑]

Incorrect, Règle de stabilité maximale non respectée.

$4d^{11}$ [↑↓↑|↑↓|↑↓|↑↓|↑↓]

Incorrect

4 nbres quantiques égaux
=> Impossible.
d'après la règle de PAULI

Exercice (I)

) Al (Z=13)

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$

[↑↓] [↑↓] [↑↓|↑↓|↑↓] [↑↓] [↑|_|_]

Couche de valence, $3s^2 3p^1$

	$3s^2$	$3p^1$
	[↑↓]	[↑|_|_]
n	3 ; 3	3
	0 ; 0	1
	0 ; 0	-1, ou 0, ou 1
	$+\frac{1}{2}$; $-\frac{1}{2}$	$+\frac{1}{2}$

$$\boxed{E_i = -13{,}6 \frac{Z_i^{*2}}{n^2}}$$

Energie de l'e^- i dans l'atome polyelectronique.

$$\boxed{E = \sum_i E_i}$$

Energie totale

$$\boxed{Z_i^* = Z - \sum_j \sigma_j}$$

→ cte d'écran = effet d'écran exercé par un e^- du groupe j sur l'e^- du groupe i

charge effective ressentie par l'e^- i = nbre

- Si $j > i$, $\sigma_j = 0$
- Si $j = i$, $\sigma_j = 0{,}35$
  (sauf si $i=j=1 \Rightarrow \sigma_j = 0{,}31$)
- Si $j < i$ $\sigma_j = 1$
  (sauf si i est sous p et $\Delta n = 1$) $\Rightarrow \sigma_j = 0{,}8$

Groupes de niveau de Slater

	1s	2s 2p	3s 3p	3d	4s 4p	4d
Gr	1	2	3	4	5	6

3) Al, $\underbrace{1s^2}_{1}$ $\underbrace{2s^2 2p^6}_{2}$ $\underbrace{3s^2 2p^1}_{3}$

Groupe de Slater.

Energie totale, $E = 2E_1 + 8E_2 + 3E_3$

E_1 energie d'1 e^- du groupe $1s^2$

E_2 energie d'1 e^- du groupe $(2s^2 2p$

E_3 energie d'1 e^- du groupe $(3s^2 3p^1$

$$E_1 = -13{,}6 \frac{Z_1^{*2}}{1^2} \text{ (eV)}$$

$i=j=1$

$$Z_1^* = Z - \sum_j \sigma_j = 13 - 1 \times 0{,}31 = 12{,}69$$

$$E_1 = -13{,}6 \frac{12{,}69^2}{1^2} = -2190{,}09$$

$$E_2 = -13{,}6 \frac{Z_2^{*2}}{2^2}$$

$$Z_2^* = Z - \sum_j \sigma_j = 13 - 7 \times 0{,}35 - 2 \times 0{,}85 = 8{,}85$$

$$E_2 = -13{,}6 \frac{8{,}85^2}{2^2} = -266{,}297 \text{ eV}$$

$$E_3 = -13{,}6 \frac{Z_3^{*2}}{3^2}$$

$$Z_3^* = Z - \sum_j \sigma_j = 13 - 2 \times 0{,}35 - 8 \times 0{,}85 - 2 = 3{,}5$$

$$E_3 = -13{,}6 \frac{3{,}5^2}{3^2} = -18{,}51 \text{ eV}$$

$$\Rightarrow E = 2E_1 + 8E_2 + 3E_3 = 2(-2190{,}09) + 8(-266{,}97) + 3(-18{,}51)$$

$$\boxed{E = -6566{,}09 \text{ eV}}$$

ETUSUP .com

ETUSUP.com

Programmation
Cours
Informatique
Optique
Chimie
Algébre
Corrigés
Mathématiques
Travaux Pratiques
Electricité
Physique
Résumés
Analyse
Diapo
Exercices
Livres
Contrôles Continus
Langues
MTU
Mécanique
Thermodynamique
Divers
Multimedia
Economie
Travaux Dirigés
Droit
Chimie Organique

et encore plus..